

УДК 680.18:669.71

Ю. В. Сыроватко

Институт охраны почв Украины (Днепропетровский филиал), г. Днепр (Украина)

yu.syrovatko@gmail.com

ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНАЯ ТЕПЛОЕМКОСТЬ ДЕКАГОНАЛЬНЫХ КВАЗИКРИСТАЛЛОВ

В работе рассчитана теплоемкость декагональных квазикристаллических фаз в сплаве Al–Co–Ni при высоких температурах. Выражение для расчета теплоемкости получено с использованием модели Дебая. Для квазикристаллических фаз наблюдается линейная «избыточная» теплоемкость в диапазоне температур от 480 до 1200 К, что свидетельствует об отклонении от закона Дюлонга и Пти. «Избыточная» теплоемкость определяется особенностями анизотропии декагональных квазикристаллов.

Ключевые слова: квазикристаллы, анизотропия, модель Дебая, дисперсионный закон, температурная зависимость теплоемкости, «избыточная» теплоемкость

Yu. V. Syrovatko

HIGH TEMPERATURE OF DECAGONAL QUASICRYSTALS HEAT CAPACITY

The heat capacity of decagonal quasicrystals of the Al–Co–Ni alloy was calculated at the high temperatures in this work. The expression for the heat capacity of the quasicrystals was obtained based on the Debye model. For the quasicrystals, the linear “excessive” heat capacity is observed in the range of temperatures between 480 to 1200 K which means the deviation from the 3R Dulong–Petit value. The “excessive” heat capacity relates to the peculiarities in the decagonal quasicrystal anisotropy.

Key words: quasicrystals, anisotropy, the Debye model, dispersive law, temperature heat capacity dependence, “excessive” heat capacity

Квазикристаллические сплавы можно использовать в качестве наполнителей композиционных материалов [1] благодаря присущим им свойствам. Особый интерес исследователей вызывает теплоемкость

квазикристаллических фаз данных сплавов [2]. Эта характеристика является основной энергетической величиной, отображающей стабильность квазикристаллов к температурным воздействиям [1], возникающим при изготовлении композиционных материалов. Экспериментальные исследования [2] показали, что квазикристаллические фазы имеют так называемую «избыточную» теплоемкость при высокой температуре, однако это явление не получило достаточного объяснения. В связи с этим целью данной работы является исследование влияния температуры на теплоемкость декагональных квазикристаллических фаз сплава Al–Ni–Co в сравнении с кристаллическими фазами.

Поскольку структура кристаллической фазы изотропна, дисперсионный закон имеет линейную зависимость во всех направлениях. Свободная энергия F кристаллической фазы при высоких температурах определяется по формуле [3]:

$$F = \frac{TV}{\pi^2} \int_0^\infty dk_x \int_0^\infty dk_y \int_0^\infty dk_z \ln \left(1 - \exp \left(-\frac{\hbar u k}{T} \right) \right), \quad (1)$$

где u — групповая скорость; k_x, k_y, k_z — соответствующие волновые вектора; T — температура; V — объем; \hbar — постоянная Планка.

Заменив, согласно формализму Дебая, верхнюю границу интегрирования на величину $\frac{\hbar u k}{T}$, получим

$$F = \frac{Vk^3}{2\pi^2 3} \left(T \ln \left(\frac{\hbar u k}{T} \right) - \frac{7}{6} T \right). \quad (2)$$

Отсюда легко найти соотношение для энергии $E = F + TS = \frac{Vk^3 T}{2\pi^2 3}$,

где $S = -\frac{\partial F}{\partial T}$. Выражение для теплоемкости соответствует сфере Де-

бая [4] и равно $C = \frac{Vk^3}{2\pi^2 3} = 3R$. Отсюда следует, что при высоких тем-

пературах теплоемкость кристаллической фазы подчиняется закону Дюлонга — Пти.

Структура квазикристаллической декагональной фазы анизотропна. Эти кристаллы имеют квазипериодическое строение в направлениях x и y и периодическое строение в направлении z . Как следствие, наблюдается различие дисперсионных законов в разных направле-

ниях. В плоскости $xу$ дисперсионный закон представлен квадратичной зависимостью $\chi^2 = k_x^2 + k_y^2$, а в направлении z имеет линейную зависимость $const \cdot k_z$. Поэтому свободную энергию для декагональной квазикристаллической фазы при высоких температурах можно представить в виде [3]

$$F = \frac{8VT}{(2\pi)^3} \int_0^{\hbar k_{\max}/T} dk_z \int_0^{\hbar \chi_{\max}^2/T} \ln \left(1 - \exp \left(-\frac{\hbar}{T} \sqrt{u_z^2 k_z^2 + \gamma^2 \chi^4} \right) \right) 2\pi \chi d\chi, \quad (3)$$

где γ — групповая скорость в плоскости.

После интегрирования [4] свободная энергия будет иметь вид:

$$F = \frac{VL^2}{2\pi^2 \gamma u} \left[T \ln \hbar L - T \ln T - \frac{7}{2} T + \frac{1}{2} \hbar L - \frac{1}{8} \frac{\hbar^2 L^2}{T} + \frac{3}{80} \frac{\hbar^3 L^3}{T^2} - \frac{3}{240} \frac{\hbar^4 L^4}{T^3} + \frac{3}{672} \frac{\hbar^5 L^5}{T^4} \right], \quad (4)$$

где $L = \sqrt{u^2 k_{z\max}^2 + \gamma^2 \chi_{\max}^4}$.

Теплоемкость декагональной квазикристаллической фазы при высоких температурах:

$$C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = 3R \left[1 + \frac{3}{12} \frac{\theta^2}{T^2} - \frac{6}{40} \frac{\theta^3}{T^3} + \frac{3}{20} \frac{\theta^4}{T^4} - \frac{15}{168} \frac{\theta^5}{T^5} \right], \quad (5)$$

где $\frac{VL^2}{2\pi^2 \gamma u}$ аналогично сфере Дебая $3R$ и $\hbar L$ температуре Дебая θ [4].

График зависимости теплоемкости от температуры для декагональной квазикристаллической фазы сплава Al—Co—Ni представлен на рис.

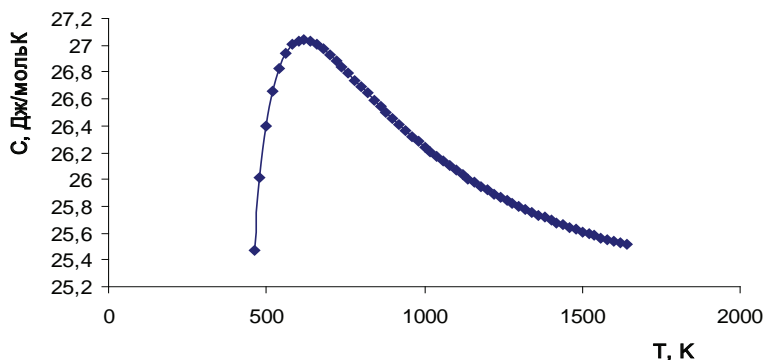


Рис. Температурная зависимость теплоемкости квазикристаллической фазы сплава Al—Co—Ni

Температура Дебая квазикристаллической фазы Al–Co–Ni около 600 К. Из рис. видно, что при температуре 600–700 К теплоемкость достигает значения 27 Дж/моль·К, что превышает уровень Дюлонга-Пти (25 Дж/моль·К). Далее теплоемкость уменьшается, но остается повышенной до температуры около 1300 К, что говорит о стабильности квазикристаллической фазы в этом температурном интервале. Следовательно, квазикристаллическая фаза является более стабильной, чем кристаллическая, что позволяет использовать квазикристаллы Al–Co–Ni в составе композиционных материалов в качестве наполнителей.

Литература

1. Sukhova O. V., Syrovatko Yu. V. Formation of Cu- and Al-based composites reinforced with Al–Co–Cu and Al–Co–Ni quasicrystalline particles // Visnik Dnipropetrovs'kogo Universitetu. Seria Fizika, radioelektronika. 2017. Issue 24, V. 25. P. 37–41.
2. Высокотемпературная теплоемкость квазикристалла $\text{Al}_{63}\text{Cu}_{25}\text{Fe}_{12}$ / А. Ф. Прекул [и др.] // Физика твердого тела. 2008. Т. 50. Вып. 11. С. 1933–1935.
3. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. М. : Наука, 1976. 583 с.
4. Сыроватко Ю. В. Неравновесные процессы формирования границ раздела между расплавленными металлами и твердыми фазами разной структуры : автореф. дис... канд. физ.-мат. наук. Днепр : ДНУ им. О. Гончара, 2017. 22 с.